

ガラスデータベース INTERGLAD の利用例の紹介 (その4)

(一社) ニューガラスフォーラム
丸山 勉, 鈴木 恵一郎

Guidance of glass database system: INTERGLAD from examples of use-4

Tsutomu Maruyama, Keiichiro Suzuki

New Glass Forum

1. はじめに

特性の予測, 或いは組成の最適化は, ガラスのデータベースを開発・技術者の方々が利用される主要な動機の一つと思われる。前号で, 特性予測式を使用しての予測及びその予測値とデータベースに収録されているファクトデータとの比較についての利用例を紹介した。本号では, データベースから重回帰分析で予測式を作成し, その予測式による予測と組成設計を行う例を紹介する。

要因(成分)と結果(特性)の関係を解析する統計分析の手法である回帰分析により得られる回帰式が, 特性の予測式となる。通常複数成分について検討されるため, ‘重’回帰分析(変数が複数)となる。INTERGLADでの検索データを取り出し, Excel等でユーザー自身で回帰分析を行うことも可能なため, 対比のためにもINTERGLAD内でも統計分析の用語をそのまま使用している。

2. 特性の予測・組成最適化(重回帰分析)

利用例ではまず組成-特性間に明瞭な加成性

〒169-0073 東京都新宿区百人町3-21-16
日本ガラス工業センター 2階

TEL 03-6279-2605

FAX 03-5389-5003

E-mail: tsutomu-maruyama@ngf.or.jp

が認められる例で重回帰式(予測式)を作成し, その予測式を用いて特性の予測, 更に組成の最適化を行う例を紹介している。(マニュアル第5章利用例3.1~3.3)

2-1. 特性予測式の導出-亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度

まずINTERGLAD内で対象のガラス系の特性データを集め, 重回帰分析を行うが, メイン画面(最初の画面)のProperty Predictionから入り, 重回帰分析或いは重回帰分析(アシスタント)から重回帰分析検索画面に入る。

<例> 亜鉛ケイ酸塩ガラスの密度の検索~重回帰分析

検索条件を Zinc-Silicate, Density at RT, NOT Patentとした検索結果(図1)から, 成分項(説明変数)を選択する(図1の①: Component)。

Delete	No.	Class No.	Data Source	Year	Data Source Number	Density at RT (g/cm3)	Density at RT (Predictive Value)	Density at RT (Residual)
<input type="checkbox"/>	1	0B02-000500	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.74		
<input type="checkbox"/>	2	0B02-000501	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.867		
<input type="checkbox"/>	3	0B02-000502	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.99		
<input type="checkbox"/>	4	0B02-000503	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	3.115		
<input type="checkbox"/>	5	0B02-000504	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	3.405		
<input type="checkbox"/>	6	0B02-000505	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.51		
<input type="checkbox"/>	7	0B02-000506	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.836		
<input type="checkbox"/>	8	0B02-000507	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.885		
<input type="checkbox"/>	9	0B02-000508	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.438		
<input type="checkbox"/>	10	0B02-000509	Handbook of Glass.	1988	v.001, p.0065	2.45		

図1 重回帰分析のための検索結果

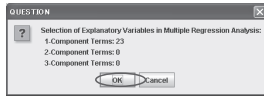
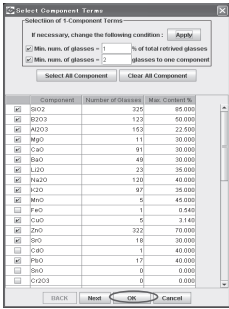


図2 成分項選択小画面 図3 Question ダイアログ

図2の1成分の成分項選択画面が現れ、ここで予測したいガラスに使用する成分を指定できる。本例ではそのままOKとし、[Question]ダイアログ画面(図3)で成分項の数を確認後、図1の検索結果画面のAnalyzeボタン(④)で重回帰分析実行画面に移行し、上部のExecuteボタンで分析を開始する。解析中に、データリスト中に解析に支障のある同一組成ガラスデータがある場合はQuestion→OKで重複データを除外する。解析結果が現れる(図4)。

<重回帰分析結果の評価：寄与率とt値>

得られた重回帰式の評価は、統計分析としての評価方法の中から次の2つの手法で行う。重回帰式としての精度を実測データとの差(残差)を評価する寄与率(R^2)で、各成分の影響

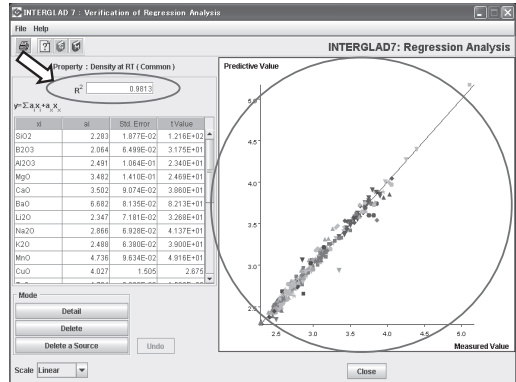


図5 寄与率による検証

の大きさを各成分の係数の評価(t値の絶対値)で行う。t値は図4内に各成分毎に表示されており、INTERGLADでは絶対値が2未満の成分は特性に対しての影響が小さいとして重回帰式から除外することを推奨している。幾つかの成分を外したら、Executeボタンで再計算して重回帰式を再度求める。寄与率は上部のVerify Resultで求まり、図5のように実測値と予測値の相関と共に表示される(1に近い方が良い)。INTERGLADでは0.8以上を推奨している。t値で成分の選択をし、重回帰式を再計算する前後の寄与率をチェックしておくことが望ましい。本例では0.98と精度の高い重回帰式となっていることが判る。得られた結果は図4の画面内に表示されているので、このままファイル保存アイコンで保存する。

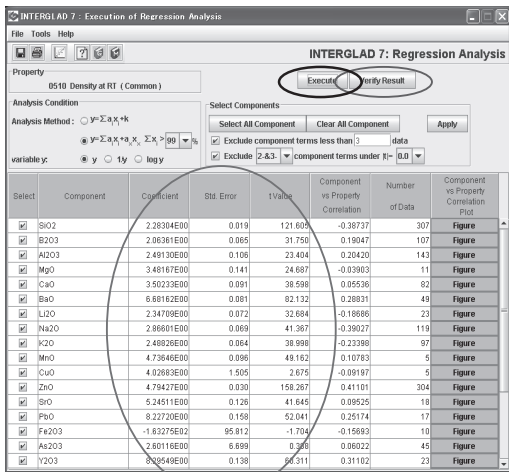


図4 重回帰分析実行画面及び結果

2-2. 特性の予測—亜鉛ケイ酸塩ガラス系の密度(利用例3.2)

2-1(利用例3.1)で保存した重回帰分析結果画面を開くと、分析済の画面では上部に特性予測と組成最適化のアイコンが現れる(図6)。

特性予測[PROP]アイコンをクリックして、予測を開始する。類似組成や、成分変更の影響等も検討する場合は、データリストから主要成分が類似のガラスをモデルとして選択してから予測を開始する。図7の特性予測画面で予測したい組成系の成分値を入力し、Calculateによ

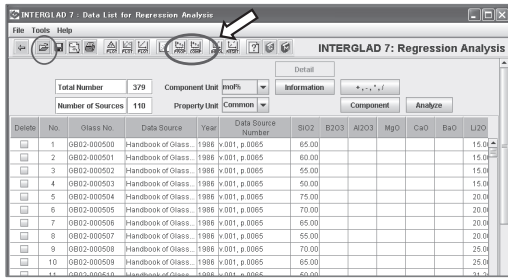


図6 分析済の重回帰分析結果画面

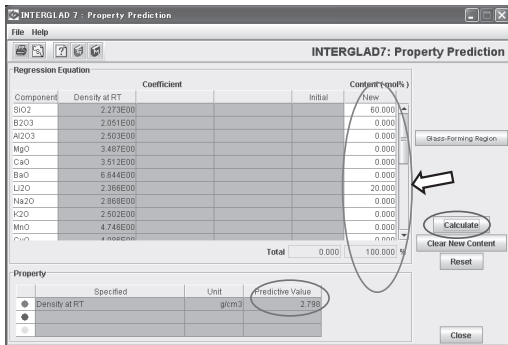


図7 特性予測画面及び予測例

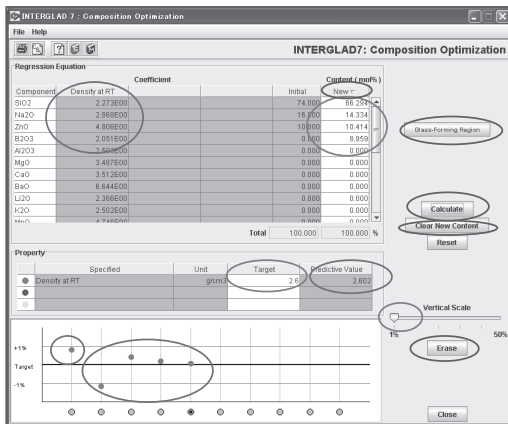


図8 組成最適化画面及び組成設計例

り予測値を得る。更にモデルガラスの組成を参考に各成分の影響を評価する。

2-3. 組成最適化—ある密度となる亜鉛ケイ酸塩ガラスの組成設計 (利用例 3.3)

2-2と同様に保存した重回帰分析結果画面を開き、まずモデル組成を選択する。組成最適化[COMP]アイコンにより図8の組成最適化画面が現れる。特性の目標値(本例では2.6)をTargetに入力し、Calculateにより組成値と特性が得られる。下部のグラフで目標値との差を確認しながら重回帰係数の大小を参考に成分量を変えてCalculateを繰り返す(最適化)。この際、変更する成分は単一でも組合せでも可能なため、目標特性が得られる成分量の組合せは一つとはならない。

3. 特性の予測: 重回帰分析によるヤング率の予測

利用例 3.4ではアルカリ土類ケイ酸塩ガラスのヤング率の予測を紹介している。前項より得られる予測式の寄与率は低いが、組成-特性間に比較的良好な加成性が認められ、前項同様1次式での予測式の作成と寄与率、t値での検証を経て、ヤング率の予測を行っている。マニュアル第5章3.4でそのフローを参照して頂きたい。

次号では多次式(3次式)による重回帰分析と特性予測、組成の最適化の例を紹介する。